

UNIVERZA V LJUBLJANI  
FAKULTETA ZA MATEMATIKO IN FIZIKO  
ODDELEK ZA FIZIKO

VIŠJE RAČUNSKÉ METODE  
**6. naloga: Klasični Monte Carlo**

Žiga Šinigoj, 28222025

Ljubljana, april 2023

# 1 Pottsov model

Obravnaval sem Pottsov model na kvadratni mreži, pripadajoči Hamiltonijan je

$$H = -J \sum_{\langle r, r' \rangle} \delta_{\sigma_r, \sigma_{r'}} , \quad (1)$$

kjer  $\sigma_r \in 1, \dots, q$ . Model ima kritično točko pri  $(e^{\beta_c J} - 1)^2 = q$ . Ker sem vzel  $J = 1/2$  so kritične  $\beta_c$

q	$\beta_c$
2	1.76
3	2.01
4	2.27
5	2.35

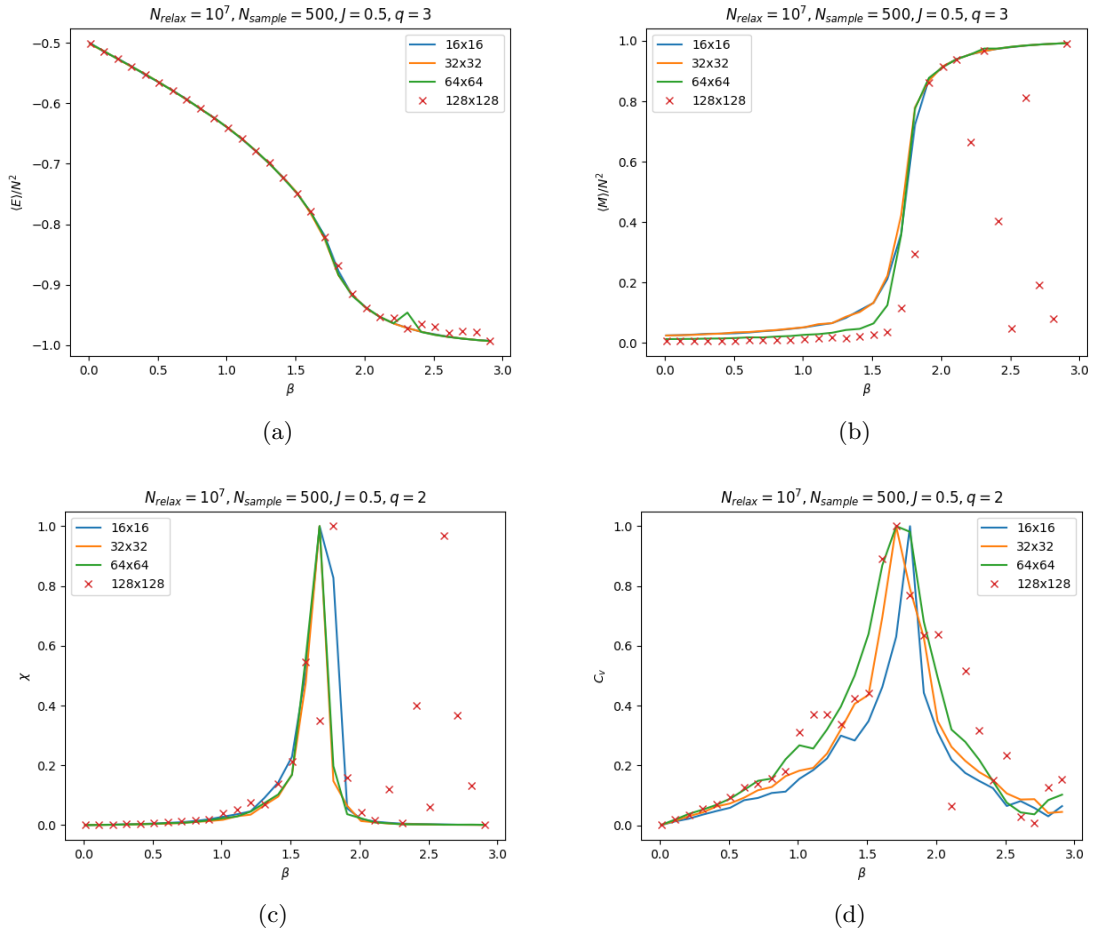
Za  $q \leq 4$  je prehod drugega reda in za  $q > 4$  prvega reda. Magnetizacija je definirana kot  $M = \sum_r e^{2\pi i(\sigma_r - 1)/q}$ . Povprečno vrednost opazljivke dobim kot

$$\langle A \rangle = \frac{1}{N_{sample}} \sum_i^{N_{sample}} A_i \quad (2)$$

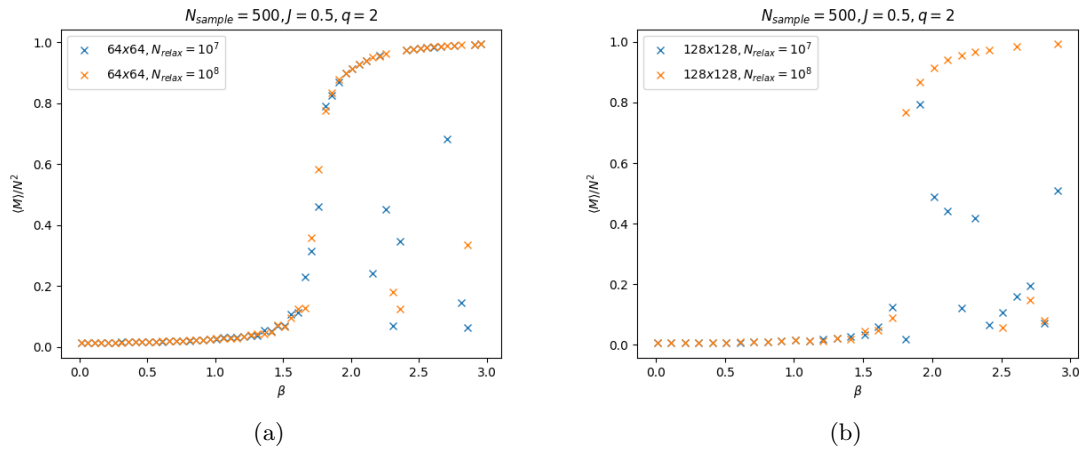
, kjer je  $N_{sample}$  število povprečenih točk. Da se izognem korelaciji med povprečenjem količin sem naredil  $N^2$  potez preden sem vzel novo vrednost  $A_i$ , kjer je  $N$  velikost mreže.

Najprej je potrebno pustiti sistem relaksirati, da doseže energijo osnovnega stanja in eno od možnih konfiguracij osnovnega stanja. To podaja parameter  $N_{relax}$ . Dober test za delovanje Pottsovega modela je preverba za  $q = 2$ , saj gre v tem primeru za Isingov model. Izračune sem naredil v C++ in grafe v Pythonu. Največ težav sem imel z odstopanjem točk magnetizacije in susceptibilnosti od analitične rešitve - nekakšne fluktuacije. Mislim da je predvsem razlog v relaksaciji sistema. Če bi pogledal graf energije v odvisnosti od števila korakov, se sistem relaksira in energija doseže minimum. Težava nastane pri obravnavi večjih sistemov (npr. 128 x 128, slika 2), kjer, kljub temu da vzamem veliko število relaksacijskih potez, nekatere točke v grafu magnetizacije še vedno odstopajo. Če bi pogledal graf energije bi na prvi pogled deloval, kot da je sistem dosegel minimum, vendar pri podrobna obravnavi (Modelska 1) lahko že počasno padanje energije povzroči anomalije v grafu magnetizacije in susceptibilnosti, medtem ko ni teh težav pri energiji in specifični toploti. Magnetizacija je veliko bolj občutljiva na ravnovesno osnovno stanje sistema. Pri manjših sistemih ni takih težav, saj definitivno dosežem minimum energije pri zmerno velikem številu relaksacijskih potez.

Opazljivke (energija, magnetizacija, susceptibilnost, specifična toplota) za  $q = 2$  v odvisnosti od velikosti mreže prikazuje slika 1. Vse opazljivke sem normiral. Energija sistema doseže plato z manjšanjem temperature, saj v tem primeru dobim feromagnetno ureditev. Kot sem že omenil bi za lepšo odvisnost pri velikih sistemih moral vzeti daljši relaksacijski čas. Temperatura faznega prehoda se sklada z teorijo, kar mi da potrditev, da sem pravilno implementiral model. Vpliv relaksacijskega časa na magnetizacijo prikazuje slika 2. Pri velikih sistemi je potrebno vzeti dolge čase, če želimo lepše grafe. Za model  $q = 5$  sem prikazal samo odvisnost energije in magnetizacije od temperature pri različnih velikostih mreže (slika 2), obnašanje okrog faznega prehoda se malce razlikuje, iz grafa magnetizacije bi lahko sklepal, da je prehod nezvezen.

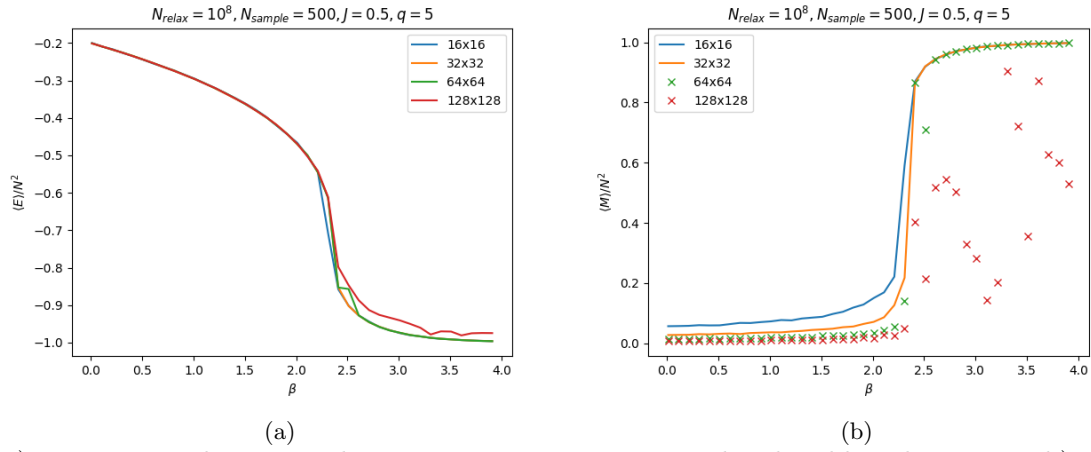


Slika 1: a) Energija kot funkcija inverzne temperature. ( $q=2$  in ne 3) b) Magnetizacija kot funkcija inverzne temperature pri različnih velikostih sistema. c) Susceptibilnost kot funkcija inverzne temperature pri različnih velikostih sistema. d) Specifična toplota kot funkcija inverzne temperature pri različnih velikostih sistema.

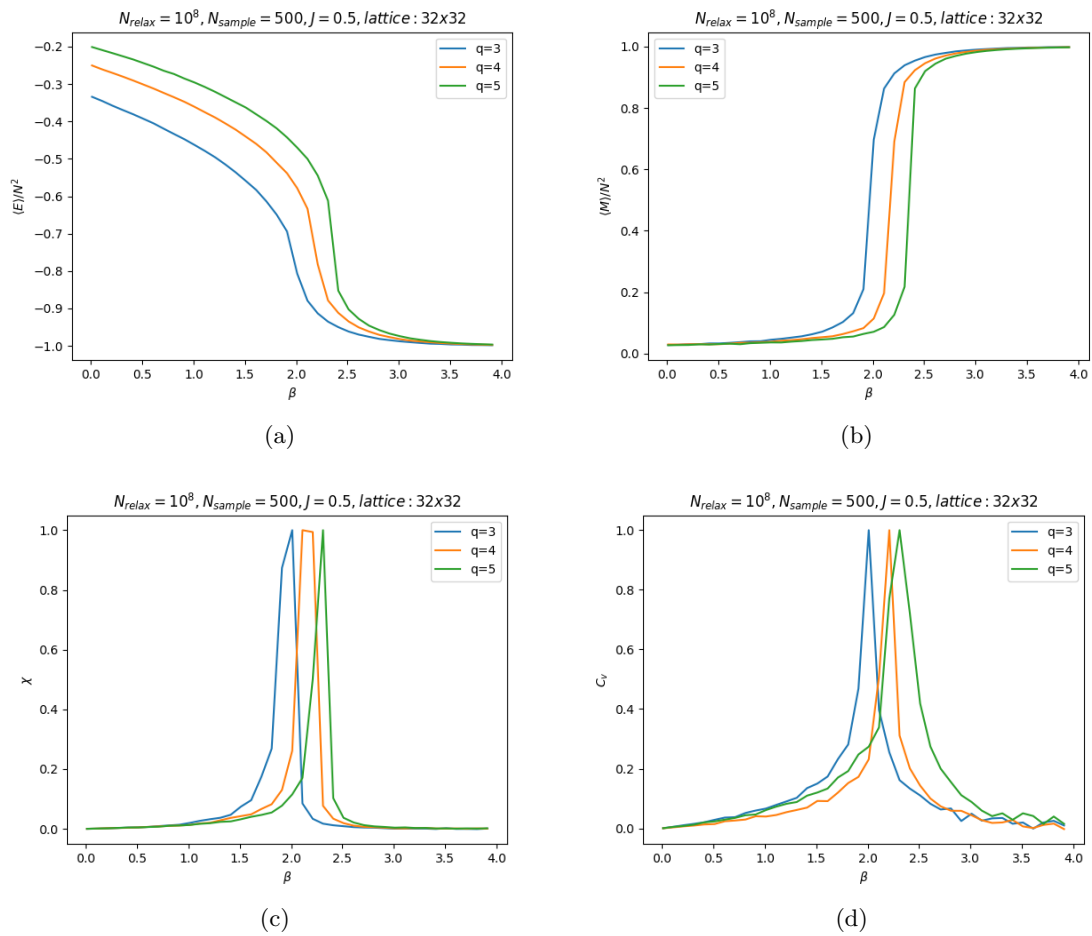


Slika 2: Magnetizacija pri različnih relaksacijskih časih.

Odvisnosti opazljivk od temperature pri različnih  $q$  prikazuje slika 4. Inverzne temperature faznih prehodov se skladajo s tabelo 1. Pri  $q=5$  zglada, da je fazni prehod res nezvezen oz. da se z večanjem  $q$  večja naklon magnetizacije pri faznem prehodu.



Slika 3: a) Energija v odvisnosti od inverzne temperature pri različnih velikostih sistema. b) Magnetizacija v odvisnosti od inverzne temperature pri različnih velikostih sistema.



Slika 4: Temperaturna odvisnost opazljivk pri različnih vrednostih  $q$ .

## 2 Heisenbergov model z vezjo

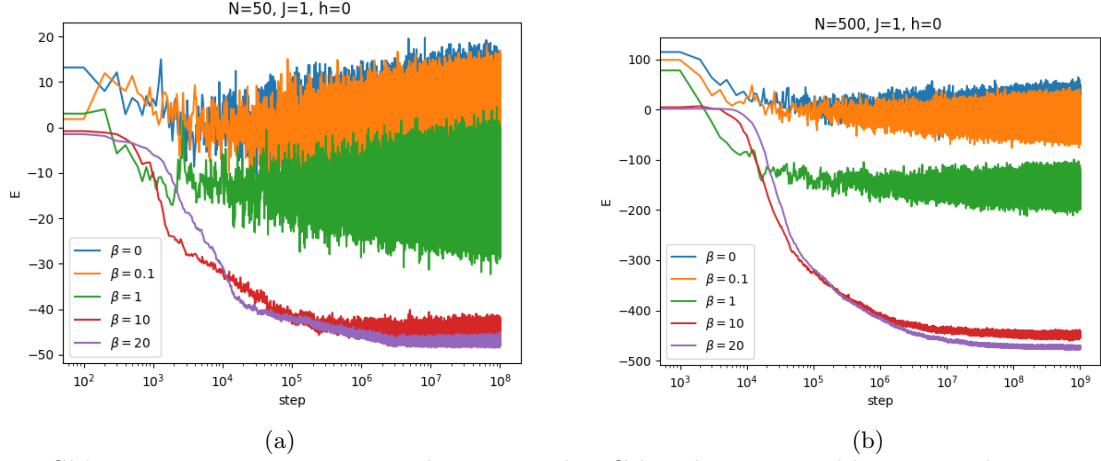
Obravnavam Heisenbergov model

$$H = - \sum_{j=1}^N (J \vec{\sigma}_j \vec{\sigma}_{j+1} - h \sigma_j^z), \quad (3)$$

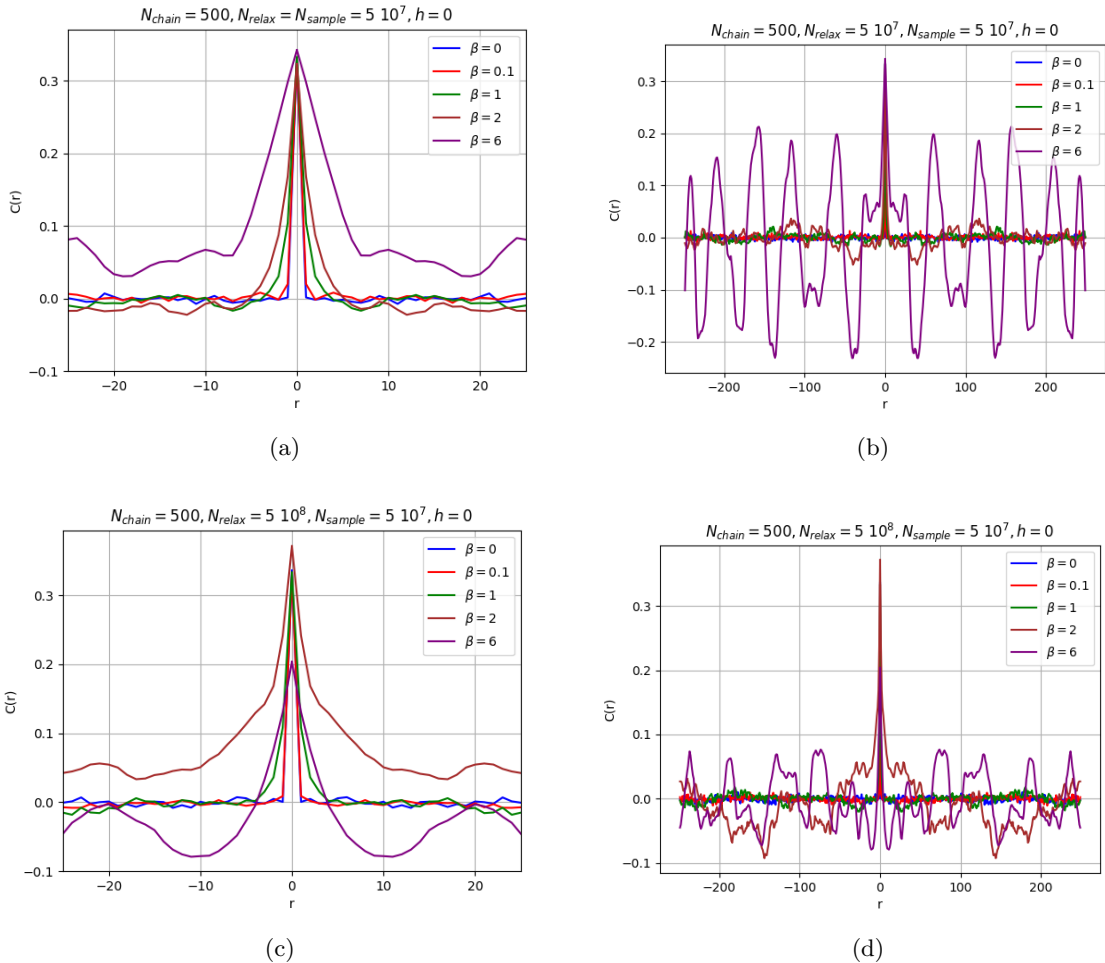
Z vezjo  $\vec{M} = 0$ . Zanima nas predvsem pojemanje spinskih korelacij

$$C(r) = \langle \sigma_0^z \sigma_r^z \rangle. \quad (4)$$

Vez sem upošteval tako, da sem vzel sosednja spina in ju seštel  $\vec{\sigma}_j + \vec{\sigma}_{j+1} = \vec{\sigma}$ , nato sem izžrebal naključen kot  $\vartheta = 2\pi x$ , kjer je  $x \in [0, 1)$  naključna spremenljivka. Vektor  $\vec{\sigma}_j$  sem s pomočjo kvaternionov zavrtel okrog vsote  $\vec{\sigma}$ ,  $\vec{\sigma}_{j+1}$  sem potem izračunal kot  $\vec{\sigma}_{j+1} = \vec{\sigma} - \vec{\sigma}_j$ . Začetno stanje mora tudi imeti ničelno magnetizacijo. Pripravil sem ga tako, da je vsak naslednji spin zavrt v x-z ravnini za  $90^\circ$  okrog y osi glede na prejšnji spin. Vsak MC korak vsebuje  $2N$  rotacij, kjer je  $N$  velikost verige. Energijo sistema v odvisnosti od števila korakov prikazuje slika 5. Zanimivo je pri majhnih temperaturah gre energija proti  $-JN$ , kar bi pomenilo feromagnetno ureditev, ki bi kršila vez. Veriga se uredi spiralno in zato je energija nekoliko manjša od  $-JN$ , saj so sosednji vektorji malo razmaknjeni. Spinske korelacije prikazuje slika 6. Večji relaksacijski čas bolj zmanjša amplitudo korelacij bolj oddaljenih spinov.



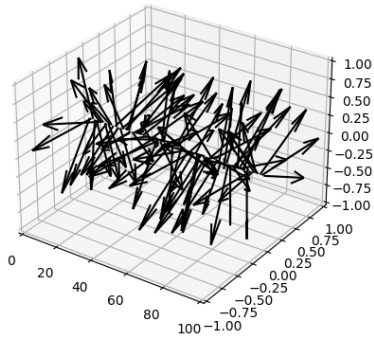
Slika 5: Energija sistema v odvisnosti od MC korakov za 2 velikosti spinske verige.



Slika 6: Spinske korelacije pri dveh različnih  $N_{relax}$ .

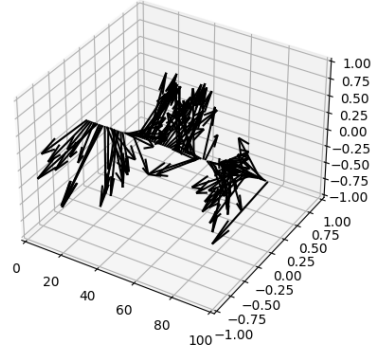
Pogledal sem si še osnovno konfiguracijo spinske verige pri različnih temperaturah (slika 7), pri velikih temperaturah veriga ni urejena, ko pa se temperatura manjša se spiralno uredi.

$$N_{chain} = 100, N_{relax} = 1 \cdot 10^8, N_{sample} = 1 \cdot 10^7, h = 0, J = 1, \beta = 0$$



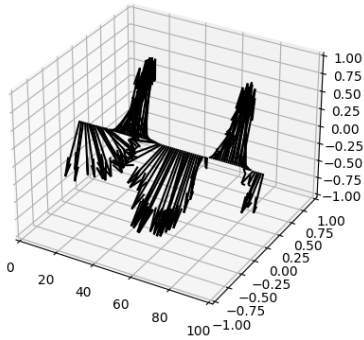
(a)

$$N_{chain} = 100, N_{relax} = 1 \cdot 10^8, N_{sample} = 1 \cdot 10^7, h = 0, J = 1, \beta = 10$$



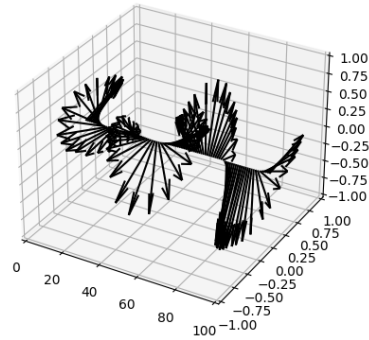
(b)

$$N_{chain} = 100, N_{relax} = 1 \cdot 10^8, N_{sample} = 1 \cdot 10^7, h = 0, J = 1, \beta = 100$$



(c)

$$N_{chain} = 100, N_{relax} = 1 \cdot 10^8, N_{sample} = 1 \cdot 10^7, h = 0, J = 1, \beta = 1000$$



(d)

Slika 7: Osnovno stanje spinske verige pri različnih vrednostih  $\beta$ .

### 3 Zaključek

Z MC metodami lahko dobro opišem vrednost opazljivk v ravnovesnem, termalnem stanju. Pri simulaciji je potrebno biti pozoren na relaksacijo sistema in korelacijo vzorčenih točk, da dobimo zanesljive rezultate.